

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТРОЙСТВ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

УДК 538.975:621.383.5

А. С. ОПАНАСЮК, д-р фіз.-мат. наук, проф., СумДУ, Суми;
Д. І. КУРБАТОВ, канд. фіз.-мат. наук, начальник НДЧ СумДУ, Суми;
Т. О. БЕРЕСТОК, аспірант, СумДУ, Суми;
О. А. ДОБРОЖАН, аспірант, СумДУ, Суми;
Р. В. ЛОПАТКА, студент, СумДУ, Суми

МОДЕЛЮВАННЯ ОСНОВНИХ ХАРАКТЕРИСТИК СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ ГЕТЕРОПЕРЕХОДІВ $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ і $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$

В роботі з використанням програмного середовища SCAPS-3200 проведено моделювання темнових та світлових ВАХ, а також спектральних розподілів квантової ефективності плівкових сонячних елементів (СЕ) на основі ідеальних гетеропереходів $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ і $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$. Показано, що заміна традиційного матеріалу віконного шару фотоперетворювачів CdS на більш широкозонний матеріал ZnS приводить до зростання ККД. Встановлені конструктивні параметри СЕ на основі багат шарової системи $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$, які забезпечують їх максимальну ефективність. Вироблені рекомендації щодо оптимізації технології створення реальних дешевих та високоефективних плівкових перетворювачів сонячної енергії.

Ключові слова: плівкові сонячні елементи, телурид кадмію, гетероперехід, моделювання, вольт-амперні характеристики, квантова ефективність, ККД.

Вступ

Використання сонячної енергії сьогодні розглядається як перспективний засіб розв'язання глобальної енергетичної кризи. Серед різних способів перетворення енергії Сонця у електричну особливу увагу привертає її фотоелектричне перетворення. Якщо у 2009 році світове виробництво фотоелектричних елементів і модулів складало 12,3 ГВт [1], то в найближчі декілька років воно збільшиться до 20 ГВт [2]. За даними Міністерства енергетики США, сонячна енергія стане економічно вигідною для широко-масштабного виробництва, якщо її вартість буде знижена до \$ 0,33/Вт [3].

У наш час для створення сонячних елементів (СЕ) використовується монокристалічний, полікристалічний та аморфний Si [4, 5], тонкі плівки різних напівпровідників [5, 6] і навіть органічні матеріали [7]. Плівки телуриду кадмію (CdTe) сьогодні розглядаються як один з провідних матеріалів для розробки економічно ефективних фотоперетворювачів, оскільки цей матеріал має оптимальну для перетворення сонячної енергії ширину забороненої зони (ЗЗ) ($E_g=1,46$ eV) та є прямозонним, що забезпечує сто відсоткове поглинання світла вже при товщині шару $d\sim 2\text{--}3$ мкм [8]. Одночасно це перша технологія яка дозволяє отримувати сонячну енергію за ціною нижчою ніж \$ 1/Вт (\$ 0,85) [9]. За теоретичними оцінками ефективність плівкових СЕ з поглинаючим шаром CdTe складає 28-30% [8, 10]. Реальний ККД таких фотоперетворювачів набагато нижчий. Найбільш перспективними

для створення високоефективних світлоперетворюючих приладів при цьому вважаються СЕ на основі анізотипних гетеропереходів (ГП). Так для гетероперехідного фотоперетворювача $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$ в наш час отримано ККД який складає 18,3 % [11]. Подальше підвищення економічної ефективності таких СЕ можливе як шляхом збільшення їх ККД так і шляхом здешевлення технології виробництва.

Аналіз останніх досліджень та літератури

Одним з ефективних шляхів збільшення ККД СЕ з поглинаючим шаром CdTe є заміна матеріалу оптичного вікна. Віконні шари CdS ($E_g=2,45$ eV) при цьому можуть бути замінені на більш широкозонний матеріал - ZnS ($E_g=3,68$ eV) [12]. Згідно з теоретичними уявленнями це повинно привести до збільшення фоточутливості СЕ в ультрафіолетовій області спектру та підвищення їх ефективності. Важливим з екологічної точки зору є те, що ZnS є нетоксичним («Cd-free») матеріалом завдяки відсутності у складі важких металів. Саме тому плівки ZnS набули широкого використання як альтернативний до CdS шар оптичного вікна у високоефективних СЕ (ККД=18,6%) на основі халькопіритних сполук CuInSe_2 (CIS), $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) [13]. Однак існуючі сьогодні СЕ на основі ГП $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ мають ККД що не перевищує 4%. Для підвищення ефективності таких СЕ необхідна оптимізація властивостей як окремих шарів так і конструкції фотоперетворювача в цілому, що можливо шляхом моделювання фізичних процесів, що відбуваються у приладі.

Для моделювання характеристик СЕ з ГП існує декілька програм (AMPS-1D, SCAPS-1D, PC-1D, ASA та AFORS-HET), але найбільш розробленою та зручною для використання можна вважати програму SCAPS-3200 [14]. Можливості даного програмного середовища дозволяють враховувати як індивідуальні властивості напівпровідникових шарів, так і процеси рекомбінації, що відбуваються на міжфазній границі, та розраховувати основні характеристики СЕ: темнові та світлові вольт-амперні характеристики (ВАХ), спектральні розподіли квантової ефективності та ін. Аналіз ВАХ дозволяє визначити такі важливі параметри фотоперетворювачів як густина струму короткого замикання (J_{sc}), напруга холостого ходу (U_{oc}), фактор заповнення ВАХ (FF) та ККД (η) фотоперетворювачів [5].

Оптимізації конструктивних параметрів СЕ на основі ГП $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$ шляхом моделювання їх основних робочих характеристик з використанням програми SCAPS присвячені дослідження [15-16]. Відповідні роботи де проводиться оптимізація робочих характеристик фотоперетворювачів на основі багатошарової системи $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ відсутні. Це і обумовило мету дослідження.

Мета і постановка задачі

Метою роботи є моделювання основних характеристик СЕ на основі ГП $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ та їх порівняння з характеристиками приладів на основі багатошарової системи $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$, визначення оптимальних конструктивних параметрів фотоперетворювачів нової конструкції.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити наступні завдання: провести розрахунок темнових та світлових ВАХ, а також спектральних розподілів квантової ефективності пліткових СЕ на основі ідеальних ГП $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$ і $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$; визначити J_{sc} , U_{oc} , FF та η фотоперетворювачів при різних товщинах віконних $d_{\text{ZnS(CdS)}}$ та поглинаючого шару d_{CdTe} ; провести порівняння отри-

маних результатів та визначити оптимальні конструктивні параметри СЕ. Виробити рекомендації щодо оптимізації конструкції реальних фотоперетворювачів.

Результати досліджень

При моделюванні ВАХ СЕ та розрахунку їх основних параметрів може бути використана еквівалентна схема ідеального фотоперетворювача, яка представляє собою паралельно з'єднані генератор струму та діод.

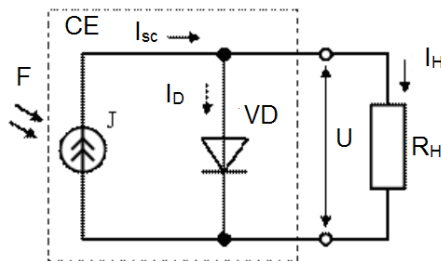


Рис.1 – Еквівалентна схема ідеального СЕ

Вихідний струм фотоелемента на основі p - n та ГП переходу, у відповідності до рис. 1, можна знайти за законом Кірхгофа:

$$I = I_{sc} - I_D = I_0 \left[\exp\left(\pm \frac{eU}{AkT}\right) - 1 \right], \quad (1)$$

де I – вихідний струм фотоелемента; I_D – струм діоду еквівалентної схеми заміщення; I_0 – зворотний струм насичення діоду; e – заряд електрона; U – вихідна напруга фотоелемента; k – стала Больцмана; A – діодний коефіцієнт або коефіцієнт ідеальності переходу; T – температура p - n переходу.

При розгляді роботи реальних СЕ потрібно враховувати їх послідовний опір та опір витоку. Тоді вираз для опису ВАХ запишеться у вигляді

$$I = I_0 \left[\exp \frac{e(U - IR_s)}{AkT} - 1 \right] + \frac{(U - IR_s)}{R_p}, \quad (2)$$

де R_s - послідовний опір фотоелемента; R_p - шунтуючий опір.

Коефіцієнт корисної дії фотоперетворювача розраховується за формулою

$$\eta = \frac{FF \cdot I_{sc} \cdot U_{oc}}{P}, \quad (3)$$

де P – потужність випромінювання, що падає на СЕ; FF – фактор заповнення ВАХ, який дорівнює

$$FF = \frac{I_m \cdot U_m}{I_{sc} \cdot U_{oc}}, \quad (4)$$

де I_m та U_m – густина струму та напруга, що відповідають найбільшій потужності приладу.

При роботі СЕ відбуваються наступні процеси:

1. Генерація електронно-діркових пар під дією випромінювання;
2. Дифузія неосновних фотогенерованих носіїв до p - n або ГП;
3. Розділення носіїв переходом;
4. Їх збирання омичними контактами.

На ефективність СЕ впливає велика кількість параметрів як самого приладу так і напівпровідникових матеріалів на основі яких він створений. Але основні втрати енергії пов'язані з відбиттям сонячного випромінювання від поверхні перетворювача, проходженням частини світла через фотоелемент без поглинання, поверхневою, міжфазною та об'ємною рекомбінацією генерованих носіїв заряду, внутрішнім та контактним опором приладу тощо [5, 8].

Для розрахунку основних характеристик плівкових СЕ в роботі використана програма SCAPS-3200. Ця програма дозволяє моделювати структури, що складаються не більше ніж з семи напівпровідникових шарів, з різними профілями легування та довільним енергетичним розподілом донорів чи акцепторів у цих шарах та на гетеромежі. Відповідні параметри задаються користувачем програмного забезпечення. В таблиці 1 представлені основні характеристики напівпровідникових матеріалів, що використані в роботі при моделюванні процесів у ГП n -CdS/ p -CdTe та n -ZnS/ p -CdTe. Моделювання проводилося в умовах освітлення АМ 1,5 та кімнатній температурі ($T=300$ K).

Таблиця 1. Характеристики напівпровідникових шарів, що використовувалися при моделюванні [17]

Параметри	Сполуки		
	p - CdTe	n - CdS	n - ZnS
Ширина заб. зони (300 K) E_g , eV	1,46	2,45	3,68
Спорідненість до електрона χ , eV	4,28	4,5	4,45
Діелектрична проникність ε	10,6	10	8,3
Ефект. густина станів зони провідності N_c , см^{-3}	$9,15 \cdot 10^{17}$	$2,2 \cdot 10^{18}$	$6,34 \cdot 10^{18}$
Ефект. густина станів валентної зони N_v , см^{-3}	$5,19 \cdot 10^{18}$	$1,8 \cdot 10^{18}$	$1,46 \cdot 10^{19}$
Рухливість електронів μ_n , $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	70	50	30
Рухливість дірок μ_p , $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	30	5	7

Основними конструктивними параметрами, що впливають на ефективність роботи СЕ є товщини віконного та поглинаючого шарів. Тому у роботі був досліджений вплив цих величин на характеристики фотоперетворювачів та визначені їх оптимальні значення. Моделювання проводилося в діапазоні зміни товщини поглинаючого шару CdTe $d = 0,1 - 5,0$ мкм та віконного шару ZnS (CdS) $d = 0,05 - 0,50$ мкм. Розраховані темнові та світлові ВАХ СЕ двох типів наведені на рис 1.

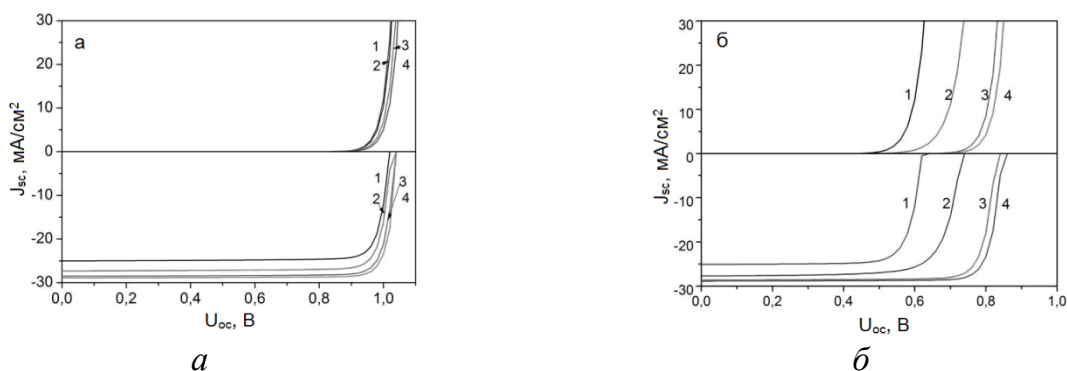


Рис. 2 – Темнові та світлові ВАХ СЕ з ГП: а – n -ZnS/ p -CdTe; б – n -CdS/ p -CdTe; при різній товщині 1 – d_{CdTe} : 0,5 мкм; 2 – 1 мкм; 3 – 3 мкм; 4 – 4 мкм; 5 – 5 мкм

Аналіз світлових ВАХ СЕ показав, що їх ККД суттєво підвищується при збільшенні товщини поглинаючого шару CdTe до 3-4 мкм, практично стабілізуючись при більших значеннях. При збільшенні товщини віконного шару, внаслідок зменшення коефіцієнту його пропускання, характеристики СЕ погіршуються (рис.2). Особливо це помітно для фотоперетворювачів з віконним шаром CdS ККД яких падає від 25,05 до 20,91 при збільшенні товщини d_{CdS} від 0,05 мкм до 0,5 мкм. Ефективність СЕ $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ слабо залежить від товщини шару ZnS. Це пов'язано з тим, що завдяки великій ширині ЗЗ цей матеріал пропускає світло практично у всій області прозорості атмосфери.

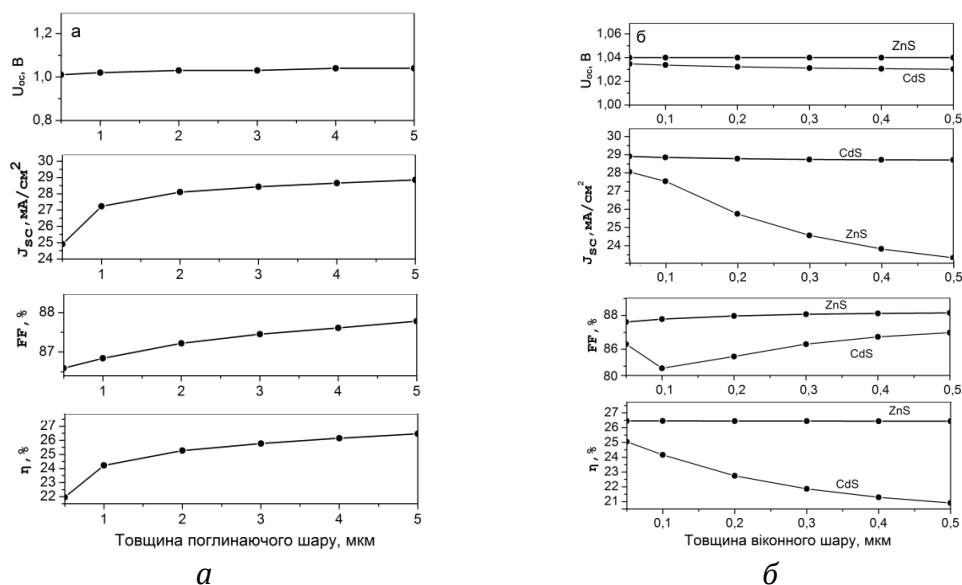


Рис. 3 – Залежність U_{oc} , J_{sc} , FF , η від:
 а – товщини поглинаючого шар CdTe при $d_{ZnS} = 0,05$ мкм;
 б – віконних шарів CdS, ZnS при $d_{CdTe} = 3$ мкм (б)

Спектральні залежності квантової ефективності фотоперетворювачів на основі ГП $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ та $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$ наведені на рис. 4. Як видно з рис. результати моделювання добре співпадають з теоретичними очікуваннями. Квантова ефективність СЕ $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ є суттєво вищою ніж $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$ саме в ультрафіолетовій області.

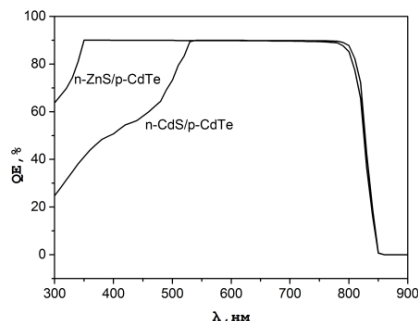


Рис. 4 – Залежність квантової ефективності (QE) від довжини хвилі для СЕ на основі ГП $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ та $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$ при $d_{CdTe} = 3$ мкм та $d_{ZnS(CdS)} = 0,05$ мкм

Нами проведено порівняння характеристик фотоперетворювачів на основі ГП $n\text{-CdS}/p\text{-CdTe}$, отриманих шляхом моделювання та реальних (таблиця 2). Значення

ККД 16,5% були отримані авторами [8] для СЕ з товщиною шару CdS – 0,1 мкм та CdTe – 8 мкм. Ці параметри досить близькі до оптимальних. Разом з тим товщина поглинаючого шару CdTe (як і CdS) є надлишковою, її зменшення до 3-4 мкм повинно незначно позначитися на ККД, одночасно збільшивши економічну ефективність таких СЕ, внаслідок економії матеріалу. Зменшення товщини шару CdTe крім цього повинно вести до зменшення послідовного опору фотоперетворювача, що в свою чергу позначиться на збільшенні їх ефективності. Це у повній мірі стосується і СЕ з віконним шаром ZnS.

Таблиця 2. Вихідні параметри СЕ з оптимальними конструкційними параметрами ($d_{\text{CdTe}} = 3$ мкм, $d_{\text{ZnS(CdS)}} = 0,05$ мкм)

ГП	U_{oc} , В	J_{sc} , мА/см ²	FF , %	η , %	Примітка
<i>n</i> -ZnS/ <i>p</i> -CdTe	1,04	28,85	87,87	26,46	Рез. моделювання
<i>n</i> -CdS/ <i>p</i> -CdTe	1,03	28,05	86,30	25,05	Рез. моделювання
<i>n</i> -CdS/ <i>p</i> -CdTe	0,85	26,10	75,50	16,7	Експерим. значення [8]

З урахуванням ККД СЕ та економічних факторів вироблені рекомендації до оптимальної конструкції приладу на основі ГП *n*-ZnS/*p*-CdTe: товщина поглинаючого шару CdTe – 3-4 мкм, товщина віконного шару ZnS – 0,05-0,10 мкм. Характеристики фотоперетворювачів з оптимальними конструкційними параметрами наведені у таблиці 2. Слід зазначити, що введення вікна з ZnS може привести до додаткового збільшення ККД СЕ внаслідок дуже низького коефіцієнта відбиття ($R=1,25\%$) світла від поверхні цього матеріалу в діапазоні довжин хвиль $\lambda=300-900$ нм [18].

Висновки

Проведено моделювання темнових та світлових ВАХ, а також спектральних розподілів квантової ефективності плівкових СЕ на основі ідеальних ГП *n*-ZnS/*p*-CdTe і *n*-CdS/*p*-CdTe. Встановлені оптимальні конструктивні параметри СЕ, що забезпечують їх максимальне ККД при температурі 300 К, а саме товщина поглинаючого шару CdTe – 3-4 мкм, віконного шару – 0,05-0,10 мкм. Порівняльний аналіз основних характеристик фотоперетворювачів двох конструкцій показав, що СЕ на основі ГП *n*-ZnS/*p*-CdTe мають більші значення $J_{sc}=28,91$ мА/см², $U_{oc}=1,04$ В, $FF=87,61$ та $\eta=26,46\%$ (для ГП *n*-CdS/*p*-CdTe ці значення склали $J_{sc}=28,06$ мА/см², $U_{oc}=1,03$ В, $FF=86,30$, $\eta=25,05\%$). Таким чином, заміна традиційного матеріалу віконного шару фотоперетворювачів CdS на більш широкозонний матеріал ZnS приводить до зростання їх ККД майже на 1,5%. Порівняння результатів моделювання з параметрами реальних СЕ дозволило намітити шляхи підвищення їх економічної ефективності.

Список літератури: 1. Hirshman W.P. Surprise, surprise (cell production 2009: survey) / W.P. Hirshman // Photon International. – 2010. – P. 176-199. 2. Sharma A. PV demand database-quarterly / A. Sharma // IMS Research. - 2011. – P. 90-95. 3. Kimbis T.P. Solar energy technology program / T.P. Kimbis // US Department of Energy. – 2011. 4. High efficiency amorphous and nanocrystalline silicon solar cells // B. Yan, G. Yue, X. Xu, J. Yang, and S. Guha // Physica Status Solidi A. – 2010. – V. 207, №3. - P. 671–677. 5. Poortmans J. Thin Film Solar Cells: Fabrication, Characterization and Application / J. Poortmans, V. Arkhipov // John Wiley&Sons, Chichester. – 2006. – P. 502. 6. Green M.A. Thin-film solar cells: review of

materials, technologies and commercial status / *M.A. Green* // Journal of Materials Science in Electronics. – 2007. – V.18, №10. – P. S15-S19. **7.** *Ren L.* Progress of organic photovoltaic materials / *L. Ren, S. Wang* // Recent Patents on Materials Science. – 2010. – V.3, №1. – P. 26-39. **8.** Poly-crystalline CdTe thin films for photovoltaic applications / *A. Bosio, N. Romeo, S. Mazzamuto, V. Canevari* // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. – 2006. – V. 52, №4. – P. 247-279. **9.** *Avrutin V.* Semiconductor solar cells: recent progress in terrestrial applications / *V. Avrutin, N. Izyumskaya, H. Morko* // Superlattices and Microstructures. – 2011. – V. 49, №4. – P. 337-364. **10.** *Sze S.M.* Physics of semiconductor devices (2nd edition) / *S.M. Sze* // Wiley, Amsterdam. – 1981. – P. 832. **11.** <http://www.researchgate.net/go.Deref.html?url=http%3A%2F%2Fwww.greentechmedia.com%2Farticles%2Fread%2FGE-Research-Beats-First-Solars-CdTe-PV-Efficiency-Record> **12.** Structural and electrical properties of ZnS/CdTe and ZnTe/CdTe heterostructures / *V.V. Kosyak, M.M. Kolesnyk, A.S. Opanasyuk, S.N. Danilchenko, Yu.P. Gnatenko* // Materials Chemistry and Physics. – 2013. – V. 138. – P. 731-736. **13. 14.** *Verschraegen J.* Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS / *J. Verschraegen, M. Burgelman* // Thin Solid Films. – 2007. – V. 515. – P.6276-6279. **15.** Ultra thin high efficiency CdS/CdTe thin film solar cells from numerical analysis / *M.A. Matin, N. Amin, A. Zaharin, K. Sopian* // Proceedings of the WSEAS Int. Conf. on Non-Linear Analysis, Non-Linear Systems and Chaos. ISBN: 978-960-094-9. **16.** *Bugelman M.* Modeling polycrystalline semiconductors solar cells / *M. Bugelman, P. Nollet, S. Degrave* // Thin Solid Films. – 2000. – №3. – P. 89-94. **17.** *Kasap S.* The springer handbook of electronic and photonic materials / *S. Kasap, P. Capper* // Springer. – Berlin. – 2007. – P. 1406. **18.** *Kurbatov D.* Substrate-temperature effect on the microstructural and optical properties of ZnS films obtained by close-spaced vacuum sublimation/ *D. Kurbatov, H. Khlyap, A. Opanasyuk* // Phys. Stat. Sol. A. – 2009. - V.206, №7. - P.1549-1557.

Надійшло до редколегії 28.02.2013

УДК 538.975:621.383.5

Моделивання основних характеристик сонячних елементів на основі гетеропереходів n -ZnS/ p -CdTe і n -CdS/ p -CdTe / А. С. Опанасюк, Д. І. Курбатов, Т. О. Бересток, О. А. Доброжан, Р. В. Лопатка // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Нові рішення в сучасних технологіях. – Х. : НТУ «ХПІ», 2013. – № 18 (991). – С. 149-155. – Бібліогр.: 18 назв.

В работе с использованием программной среды SCAPS-3200 проведено моделирование темновых и световых ВАХ, а также спектральных распределений квантовой эффективности пленочных солнечных элементов (СЕ) на основе идеальных гетеропереходов n -ZnS/ p -CdTe и n -CdS/ p -CdTe. Показано, что замена традиционного материала оконного слоя фотопреобразователей CdS на более широкозонный материал ZnS приводит к росту их КПД. Установлены конструктивные параметры СЕ на основе многослойной системы n -ZnS/ p -CdTe, обеспечивающие их максимальную эффективность. Выработаны рекомендации по оптимизации технологии создания реальных дешевых и высокоэффективных пленочных преобразователей солнечной энергии.

Ключевые слова: пленочные солнечные элементы, теллурид кадмия, гетеропереход, моделирования, вольт-амперные характеристики, квантовая эффективность, КПД.

Modeling of dark and light I-V characteristics and spectral response of quantum efficiency of solar cell films on the basis of ideal n -ZnS/ p -CdTe and n -CdS/ p -CdTe heterojunctions with the use of SCAPS-3200 software environment is held in this work. It is shown that the replacement of traditional material of window layer of photovoltaic devices with more wide area ZnS material leads to increase of their efficiency. The constructive parameters of solar cells on the basis of multilayer n -ZnS/ p -CdTe system which provide their maximal efficiency were established. It makes possible to optimize the technology of obtaining real cheap and highly effective thin film solar energy transformers.

Key words: film solar cells, CdTe, heterojunction, modeling, I-V characteristics, quantum efficiency, efficiency.